數學傳播　48卷2期, pp. 51-57

主成分分析及其在影像處理上的應用

陳素雲 · 周芷妤

隨著大數據時代的到來, 在許多研究領域與應用上往往面臨大量高維度數據的分析。大量數據提供更多的訊息量, 但其中可能伴隨著一些雜訊, 或不可信賴的異常值和離群值, 因而導致分析偏誤, 進而影響到最終對分析結果的決策及判斷。除此之外, 大數據也增加了分析上的計算成本、複雜度, 造成運算上的負擔, 因此, 需要找到適當的分析方法及工具, 將數據「化繁爲簡、去蕪存菁」。這不僅意味著除去不必要的訊息, 同時儘可能地保留原始數據中的有用訊息, 以減輕分析過程中的時間和成本負擔, 實現對數據更全面了解的目標。

在統計學及機器學習領域中, 主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 即爲一種常用的降低數據維度的手法。主成分分析由英國數學家卡爾·皮爾森 (Karl Pearson) 於 1901 年提出 [1], 是一種歷史悠久且相對容易運用的降維度 (dimension reduction)、去關聯性的方法, 至今在數據分析領域中仍被廣泛地應用。主成分分析是一種非監督式學習 (unsupervised learning), 其主要的核心概念是用最少的維度來呈現原本高維度數據的訊息: 將原本 p 維的特徵 (features) 以 k 維的線性組合來表達 (其中 $k < p$), 藉由主成分 (Principal Components) 找到的 k 維新特徵, 其能夠捕捉原本 p 維數據中的大部分的特性來解釋數據。換言之, 希望能夠在盡量保有原始數據訊息的情況下, 以更精簡化的形式來呈現原始數據。

PCA 原理

主成分分析的目的是將資料進行降維, 並找出最能夠解釋資料的方向: 找到一個或一個以上的投影軸 (向量), 將資料點線性投影到這個 (些) 軸上後, 使得資料有最大的變異量, 而且新特徵彼此之間線性不相關。

假設有 n 個樣本點 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n, x_i \in \mathbb{R}^p$, 透過主成分分析將資料點投影到新座標軸的做法爲:

(1) 先將資料中心移至原點 (亦即使平均數爲 0), 在此不妨假設平均數皆已爲零。

(2) 找到新的座標軸, 使得投影後的資料有最大的變異量。這個問題可以透過解共變異數矩陣

(covariance matrix) $\boldsymbol{S}$ 的特徵值分解 (eigenvalue decomposition) 得到:

$$\boldsymbol{S} \approx \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^{\mathrm{T}}$$
$$\mathbf{v}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{v}_j = 1 \quad 及 \quad \mathbf{v}_l^{\mathrm{T}}\mathbf{v}_j = 0, \quad l \neq j.$$

這裡的 $\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^p$ 對應的是共變異數矩陣 $\boldsymbol{S}$ 的第 j 個特徵向量 (eigenvector), λ_j 即爲第 j 個最大的特徵值 (eigenvalue)。舉例來說, $\{\mathbf{v}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{n}$ 則爲原資料點投影到 $\mathbf{v}_1$ 上的新座標, 這些投影後的資料點在 $\mathbf{v}_1$ 這個方向有最大的變異量。因此, 主成分分析藉由特徵值分解來找 k 個新的座標軸, 找到的 k 個特徵向量也就是資料的主成分, 而且 k 個主成分彼此之間爲正交 (orthogonal), 資料投影後的變異程度則是由特徵值來描述。以一個例子來說明, 令特徵向量矩陣爲 $\boldsymbol{V} = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_k] \in \mathbb{R}^{p\times k}$, 其對應的特徵值爲 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_k > 0$, 將原資料點 $\mathbf{x}_1$ 投影到新的座標空間上得到的新特徵爲 $\mathbf{z}_1 = [z_{11} \quad z_{12} \quad \cdots \quad z_{1k}]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^k$:

$$\begin{bmatrix} z_{11} \\ z_{12} \\ \vdots \\ z_{1k} \end{bmatrix}_{k\times 1} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1p} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{k1} & v_{k2} & \cdots & v_{kp} \end{bmatrix}_{k\times p} \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{12} \\ \vdots \\ x_{1p} \end{bmatrix}_{p\times 1}$$

其中 $\mathbf{v}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{v}_j = 1$ 及 $\mathbf{v}_l^{\mathrm{T}}\mathbf{v}_j = 0$, $l \neq j$。以此類推, 我們可以將 n 個樣本點投影後得到

$$[\mathbf{z}_1 \quad \mathbf{z}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{z}_n]_{k\times n} = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{v}_k]^{\mathrm{T}}[\mathbf{x}_1 \quad \mathbf{x}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{x}_n]_{p\times n},$$

其中 $\mathbf{z}_i = [z_{i1} \quad z_{i2} \quad \cdots \quad z_{ik}]^{\mathrm{T}}$。我們稱 $\mathbf{v}_j$ 爲第 j 個主成分, $\mathbf{z}_i$ 則被稱作主成分分數 (principal component scores)。我們有以下性質:

(i) $\mathrm{cov}(\mathbf{z}_j, \mathbf{z}_l) = \begin{cases} \lambda_j, & j = l \\ 0, & j \neq l \end{cases}$, 亦即第$j$個新特徵的變異數即爲 λ_j; 兩兩特徵之間彼此不相關。

(ii) $\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{S}) = \sum_{j=1}^{p} \lambda_j$, 亦即原特徵的變異數總和 (共變異數矩陣的trace) 即爲特徵值的總和。

(iii) $\det(\boldsymbol{S}) = \prod_{j=1}^{p} \lambda_j$, 亦即所有特徵值的乘積即爲共變異數矩陣的行列式。

• PCA 的歸納總結

1. 精簡化 (parsimony): 用較少的主成分來取代原本的高維度特徵。
2. 代表性 (representation): 主成分保有原本特徵的訊息。
3. 去相關 (decorrelation): 主成分分數 (即新特徵) 彼此之間無線性相關。

穩健主成分分析方法

雖然主成分分析相當普及且已被廣泛地應用於數據分析上, 但是當資料中有離群值 (outliers) 的存在, 或我們稱之爲資料受到汙染 (contaminated) 時, 主成分分析的結果容易產生有偏估計 (biased estimation)。因此, 許多具有穩健性 (robustness) 的主成分分析方法已被提出來克服資料中有離群值存在的情況, 使得估計的結果更加穩健、可信。面對極端值存在的情況, 一種常見的策略是根據穩健散點矩陣估計 (robust scatter matrix estimator) 來執行特徵值分解。陳素雲研究員及其合作者 (台大的洪弘教授及日本統計數理研究所的江口真透教授) 在 2022 年提出了 Robust Semiparametric PCA [2], 此方法是基於半參數理論 (Semiparametric Theory) 與 robust scatter estimator 發展出來的一種具有穩健性的主成分分析方法。

• Robust Semiparametric PCA (SPPCA)

考慮一個半參數模型 (semiparametric model) :

$$f(x) = |V_0|^{-\frac{1}{2}}\psi(d(x,\mu_0,V_0)),$$

其中 $d(x,\mu_0,V_0) = (x-\mu_0)^{\mathrm{T}}V_0^{-1}(x-\mu_0)$。$(\mu_0,V_0)$ 爲感興趣的參數(欲估計的參數), $\psi(\cdot)$ 爲無窮多維的干擾參數 (infinite-dimensional nuisance parameter), 干擾參數爲不感興趣, 但必須考慮的參數。半參數理論在不需指派 $\psi(\cdot)$ 的形式下, 確保了對參數 (μ_0,V_0) 估計式的建構, 因此, 根據半參數理論, SPPCA 提出透過以下估計式對參數 (μ_0,V_0) 做估計:

$$\mu = \frac{\int w(d(x,\mu,V))x\,dF(x)}{\int w(d(x,\mu,V))\,dF(x)}$$

$$V = \frac{p\int w(d(x,\mu,V))(x-\mu)(x-\mu)^{\mathrm{T}}dF(x)}{\int w(d(x,\mu,V))d(x,\mu,V)\,dF(x)},$$

其中 $w(\cdot)$ 爲權重函數 (weight function), $F(x)$ 爲 $f(x)$ 的累積機率函數 (cdf)。上述 SPPCA 對 V_0 的估計式可以重新整理成以下形式:

$$V = p\int\left\{\frac{h(d(x,\mu,V))}{h(d(x,\mu,V))dF(x)}\right\}\frac{(x-\mu)(x-\mu)^{\mathrm{T}}}{d(x,\mu,V)}dF(x),$$

其中 $h(u) = w(u)u$。SPPCA 透過大括號中的部分給予每個資料點不同的權重, 納入 $d(x,\mu,V)$ 的訊息及選擇適合的權重函數 $w(\cdot)$ 後, 給予極端值較小的權重, 降低極端值對估計結果的影響程度, 以達到穩健的估計結果。爲了達到這樣的目的, SPPCA 對於權重函數 $w(\cdot)$ 的選擇須滿足以下兩個條件:

(1) $\sup_u h(u) < \infty$.

(2) $\lim\limits_{u\to\infty} h(u) = 0$.

條件 (1) 確保 SPPCA 的影響函數 (influence functions) 的長度 (norm) 是有界的; 條件 (2) 則保證在有離群值的情況下, SPPCA 的估計結果具有穩健性。

PCA 於影像處理上的應用

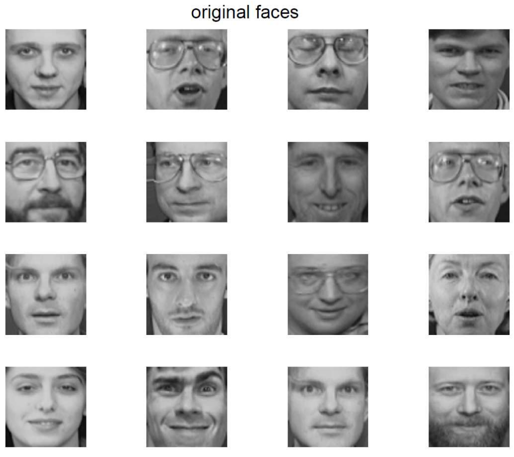
主成分分析的應用相當多元, 在影像分析上可以用於

1. 降維: 降低影像數據的維度, 進而減少數據的複雜度, 但同時保留原本數據中主要的特徵/特性。
2. 特徵提取 (feature extraction) : 識別及提取影像中最具有代表性的特徵, 助於後續分析和辨識影像的進行。
3. 降噪 (denoise) : 去除影像中不必要的雜訊, 保留影像中相對重要的細節, 提高影像的質量, 讓影像更加清晰。

接下來將介紹主成分分析於人臉辨識的應用, 透過主成分分析方法將影像中的臉部特徵抓取出來, 減少誤判影像的機會, 提高臉部辨識的成功率。

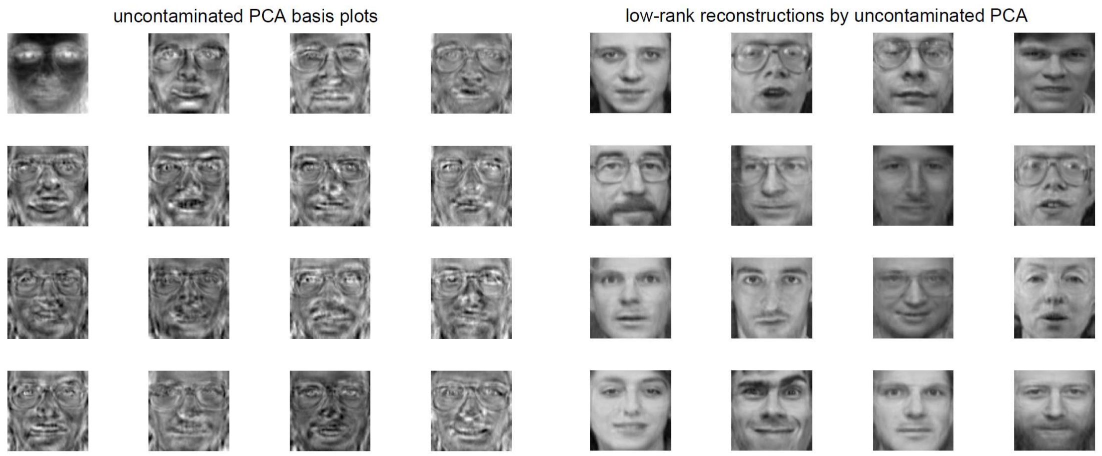
• Olivetti Faces Dataset

Olivetti 資料集是一組從 1992 年 4 月至 1994 年 4 月於 AT&T 劍橋實驗室拍攝的臉部影像。資料集包含 400 張對於不同的 40 個人所拍攝的臉部影像, 每個人各拍攝 10 張, 這些影像是在不同時間、光線、臉部表情 (微笑/不微笑、睜眼/閉眼) 及臉部細節 (戴眼鏡/不戴眼鏡) 之下拍攝, 圖一展示 16 張隨機選取的影像。每一張影像皆被轉成灰階 (數值界於 0 至 255)、大小爲 64×64 的臉部影像矩陣。



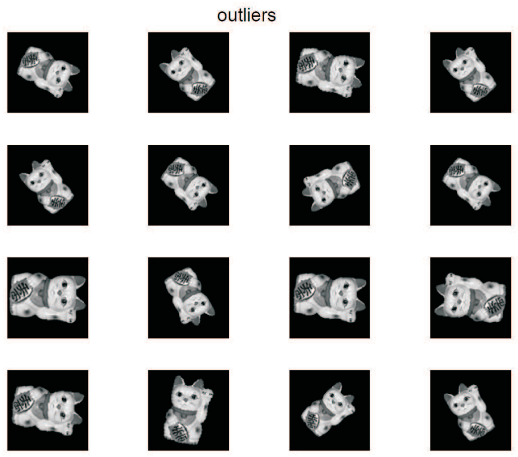
圖一: Olivetti faces。

圖二爲透過主成分分析的結果, 第一行到第四行呈現低維度影像重建 (low-rank reconstructions) 的結果, 第五行到第八行呈現 PCA 提取的臉部特徵 (eigenfaces), 或稱爲基底空間 (leading basis functions)。在這個分析中, 以維度126的臉部特徵矩陣 (其中包含 mean face) 來對原本維度 4096 的臉部影像矩陣進行低維度影像重建。



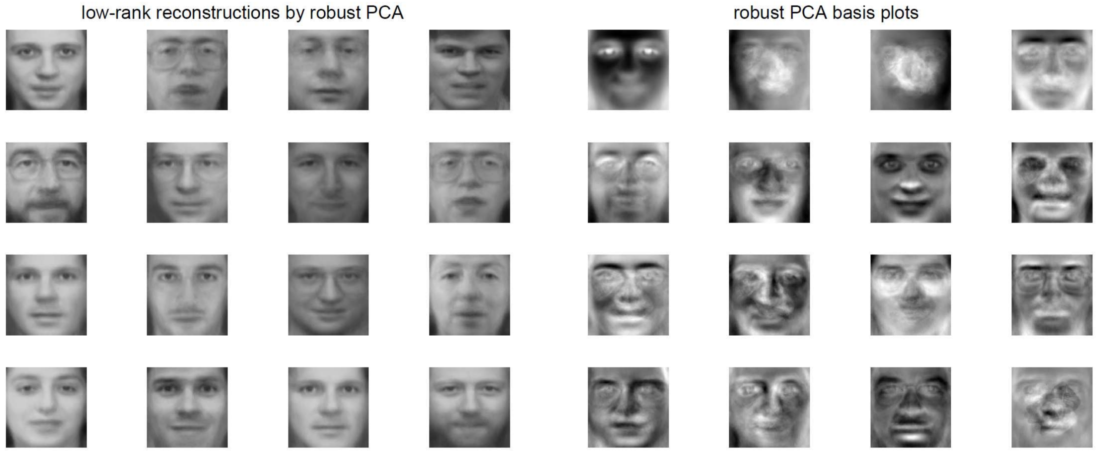
圖二: PCA 的低維度影像重建 (low-rank reconstructions) 及基底空間 (leading basis functions)。

接下來呈現影像中存在離群值的分析結果, 將文獻上的兩種穩健主成分分析方法應用於 Olivetti 資料集中: (1) 2011年由 Candès 等學者所提出的 robust PCA [3] 及 (2) 前述介紹的Robust Semiparametric PCA [2]。此分析將 20 張隨機旋轉的招財貓影像 (圖三展示 16 張隨機選取的影像) 作爲離群值加入 Olivetti 資料集中, 因此, 資料中含有 420 張影像。

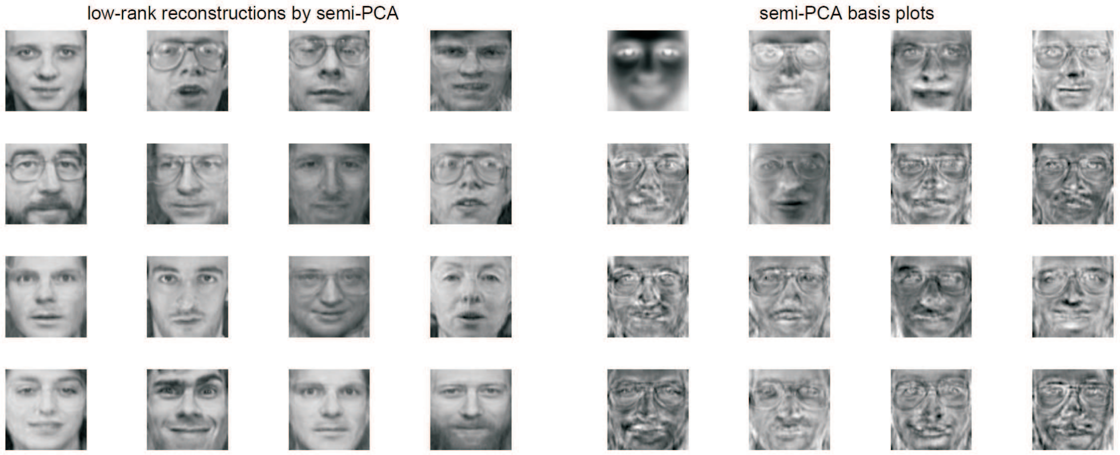


圖三: Outliers。

由圖四的結果顯示, Candès 等學者所提出的 robust PCA 找出的特徵受到了離群值的污染, 基底空間圖像中明顯可以看到招財貓的影像, 從影像重建的結果可以看出臉部表情有一點模糊、輪廓不夠清楚, 並且失去了一些細節。我們提出的 Robust Semiparametric PCA 在極端值存在的情況下, 能夠較爲不受到離群值的影響, 成功識別出主要的特徵 (見圖五), 影像重建的結果更接近真實情況 (即圖一), 與Candès 等學者所提出 robust PCA, 相比具有更精細的臉部特徵。



圖四: Candès 等學者所提出的 robust PCA 的低維度影像重建 (low-rank reconstructions) 及基底空間 (leading basis functions)。



圖五: 我們的 Robust Semiparametric PCA 的低維度影像重建 (low-rank reconstructions) 及基底空間 (leading basis functions)。

總結

我們介紹了主成分分析的原理, 包括如何找到最能夠解釋數據變異的主成分, 以及如何降低數據維度。此外, 本文還討論了穩健性主成分分析方法及其在影像降維方面的應用, 特別是介紹了一種稱爲 Robust Semiparametric PCA 的方法, 以應對數據中的離群值。在這之中, 半參數理論 (Semiparametric Theory) 是統計學中一個重要的理論框架, 它整合了參數方法和非參數方法的優點, 使其應用於一些複雜模型的推論時, 擁有更大的靈活性。這種半參數方法使統計學家能夠更靈活地應對複雜的數據情境, 進而做出更爲可靠的推斷和預測。

參考文獻

1. Pearson, K., On lines and planes of closest fit to systems of points in space, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 2 (1901), No.11, 559-572.
2. Hung, H., Huang, S. Y., and Eguchi, S., Robust self-tuning semiparametric PCA for contaminated elliptical distribution, *IEEE Transactions on Signal Processing*, 70 (2022), 5885-5897.
3. Candès, E. J., Li, X., Ma, Y., and Wright, J., Robust principal component analysis? *Journal of the ACM*, 58 (2011), No.3, 1-37.

—本文作者陳素雲爲中央研究院統計科學研究所研究員, 周芷妤爲國立臺灣大學健康數據拓析統計研究所博士後研究人員—